Simulación de Sistemas - Primer cuatrimestre 2019

Trabajo Práctico 2
Autómatas Celulares:
“Off-Lattice”

Comisión: S
Grupo: 4
Santiago Manganaro Bello (56289), smanganaro@itba.edu.ar
Agustín Ignacio Vazquez (55354), agvazquez@itba.edu.ar
26 de marzo de 2019

1. Resumen

Se analiza un modelo simple del movimiento automáticamente ordenado en sistemas de partículas con interacción biológicamente motivada. Las partículas son impulsadas con una velocidad absoluta constante (v) y en cada paso del tiempo asumen la dirección promedio de movimiento de las partículas en su vecindario, definido con un radio de interacción (r_c), con alguna perturbación aleatoria (η) agregada.

2. Introducción

Un autómata celular es un modelo matemático para un sistema dinámico que evoluciona en pasos discretos. Es un ejemplo de sistemas matemáticos construidos con muchas componentes idénticas, cada una simple, pero capaces de adquirir un comportamiento complejo en conjunto. A partir de su análisis, uno puede tanto desarrollar modelos específicos para sistemas particulares como esperar abstraer algunos principios generales que pueden llegar a ser aplicables a un conjunto variado de sistemas complejos.

Se representa con arreglos regulares de celdas individuales de la misma clase (grilla). Cada celda tiene un número finito de estados discretos. Los estados se actualizan simultáneamente (sincrónicamente) en cada paso temporal. Las reglas de actualización son determinísticas y uniformes en tiempo y espacio. Las reglas para la evolución de una celda depende solamente de un vecindario local a su alrededor.

En este trabajo se analiza un modelo de la dinámica para investigar el agrupamiento, transporte, y la transición de fase en sistemas de no equilibrio donde la velocidad de las partículas está determinada por una regla simple y fluctuaciones aleatorias. La única regla del modelo es, en cada paso de tiempo, una partícula dada impulsada con una velocidad absoluta constante asume la dirección promedio de movimiento de las partículas en su vecindad de radio de interacción (r_c) con alguna perturbación aleatoria añadida. Se muestra mediante simulaciones que, a pesar de su simplicidad, este modelo resulta en una dinámica rica y realista.

3. Desarrollo

Las simulaciones se basan en una celda con forma de cuadrado de tamaño lineal L cuyos límites son periódicos. Las partículas son representadas por puntos en constante movimiento (*off-lattice*) en el plano. La mayoría de parámetros utilizados están basados en estudios previos llevados a cabo [1]. Se utiliza el radio de interacción ($r_c = 1$) como la unidad para medir distancias entre partículas y poder determinar si las mismas afectan el movimiento de otras. Se ha podido determinar que dicho valor debe estar entre un rango determinado con el fin de observar los resultados esperados de una mejor manera; este rango tiene un límite un tanto subjetivo, pero se sabe que se encuentra directamente relacionado con el valor de L (para que se visualice un progreso paulatino, $r_c << L$, pero no tanto como para que no haya interacción). Por otro lado se establece una unidad de tiempo
($\Delta t = 1$) que representa el intervalo entre cada uno de los pasos de actualización de las direcciones y posiciones.

Las condiciones iniciales tomadas son las siguientes:

(i) a tiempo $t = 0$, N partículas son distribuidas de forma aleatoria en la grilla.

(ii) todas las partículas mantienen el módulo de la velocidad v.

(iii) se analizan tres casos diferentes de direcciones:

- distribuidas de manera aleatoria.
- direcciones iguales.
- direcciones con su opuesto (se contrarrestan las velocidades).

El valor de v=0.3 es determinado siguiendo los lineamientos propuestos por la cátedra, no sin antes haber analizado que la variación ($0.01 < v < 0.3$) del mismo no afecta los resultados (las partículas interactúan de maneras diferentes a diferentes velocidades, pero el comportamiento general era siempre el mismo). Las velocidades (v_i) de las partículas se van determinando simultáneamente en cada paso de tiempo, y la posición de la partícula (x_i) actualizada según:

$$x_i(t+1) = x_i(t) + v_i(t)\Delta t. \tag{1}$$

El ángulo de la velocidad $v_i(t+1)$ de una partícula (dirección) es actualizado según:

$$\theta(t+1) = <\theta(t)>_r + \Delta\theta, \tag{2}$$

donde $<\theta(t)>_r$ denota la dirección promedio de las velocidades de las partículas (incluida i) que se encuentran alrededor de i, dentro del radio de interacción r_c. A su vez, en la Ec. (2) $\Delta\theta$ es un número random elegido con una distribución de probabilidades uniforme entre el intervalo [-η/2 ; η/2]; por lo tanto, el $\Delta\theta$ representa una perturbación.

Quedan entonces tres parámetros importantes sin determinar, que son los que se variaron para analizar situaciones diferentes: número de partículas N, lado de la grilla L y perturbación η.

El objetivo principal, es estudiar en detalle la naturaleza de la transición determinando el valor absoluto de la velocidad promedio normalizada:

$$v_a = \frac{1}{Nv} \left| \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i \right| \tag{3}$$

Se analiza la relación entre v_a y la densidad ($\delta = N/L^2$). Con el fin de simplificar la representación solo se tienen en cuenta nueve densidades diferentes y a su vez, se fija el valor de la perturbación η. Por otro lado, se analiza la relación entre v_a y la perturbación η. En este caso, solo se tienen en cuenta diez valores de perturbación diferentes, dos valores de N y un solo valor de L. Para ambos, se seleccionan valores de entrada determinados.

Lo más importante a destacar acerca del v_a es que representa el orden del sistema. Más precisamente, cuando $v_a = 1$, el sistema está completamente ordenado; cuando $v_a = 0$, el sistema se encuentra en total desorden.

4. Análisis de Resultados

Al simular, el primer aspecto que trae controversias, es determinar cuál es el tiempo total que se debe dejar progresar el sistema, es decir, cuántas iteraciones deben realizarse. Éste es un parámetro sobre el cual [1] no establece especificaciones. Luego de un análisis exhaustivo acompañado de un considerable número de pruebas, se determina que el valor del tiempo total es relativo a las condiciones del sistema y que por lo tanto no es factible conciliar un único valor para la infinidad de sistemas posibles. Esto se ve ejemplificado en Fig.1a y Fig.2a, donde se establece como tiempo total 500 unidades de tiempo (500 iteraciones); como se puede observar, la convergencia sucede en Fig.1, pero no del todo en Fig.2. Sin embargo, a fines prácticos, se toma un valor arbitrario que para la mayoría de los casos de prueba dio resultado ($t = 2000$).

Al observar Fig.1b, se puede detectar un comportamiento particular y es que, sin importar cuales sean las condiciones iniciales de las partículas en el sistema, dado un número suficiente de iteraciones, para una determinada perturbación, se converge a un valor v_a aproximado y promedio. Siguiendo con el mismo lineamiento, se puede ver que cuanto menor es el valor de la perturbación, la convergencia es más exacta.

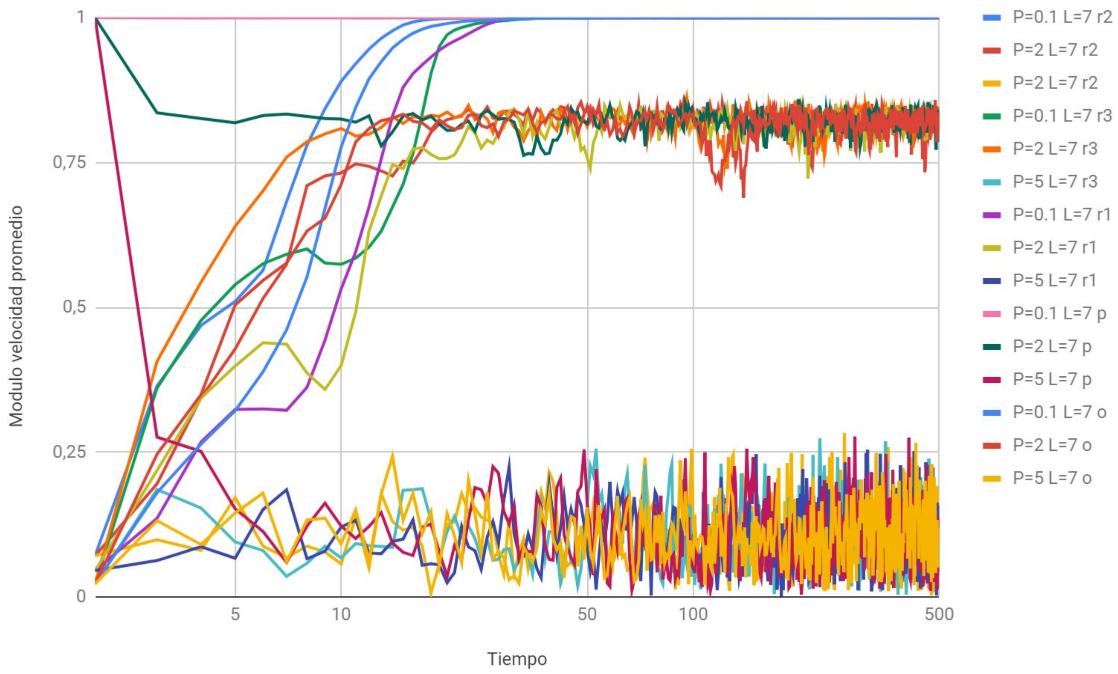

Figura 1.a: Se grafica el valor absoluto de la velocidad promedio *normalizada* (v_a) en función del tiempo total (t = *500*). Se toma 5 conjuntos de valores de entrada diferentes (r1,r2,r3,p y o), donde "r" refiere a valores randoms, "p" a valores paralelos y "o" a valores opuestos de ángulos de velocidades, para tres valores de perturbaciones diferentes (0.1, 2 y 5). La cantidad de partículas N=300 y celdas de tamaño L=7. Escala logarítmica eje x.

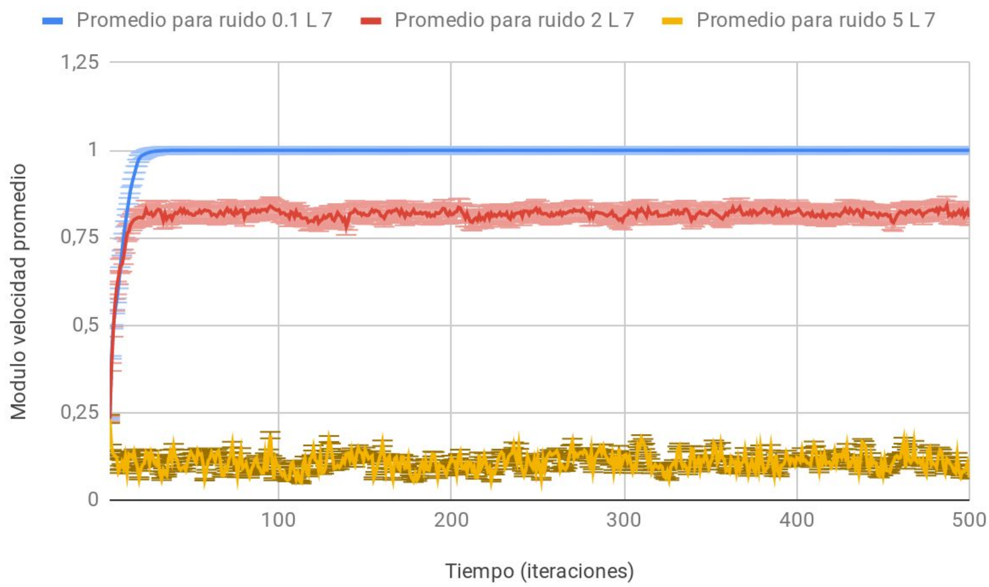

Figura 1.b: Promedio de los diferentes valores de entrada. Error promedio de 1, 3 y 5 % para ruidos 0.1, 2 y 5 respectivamente.

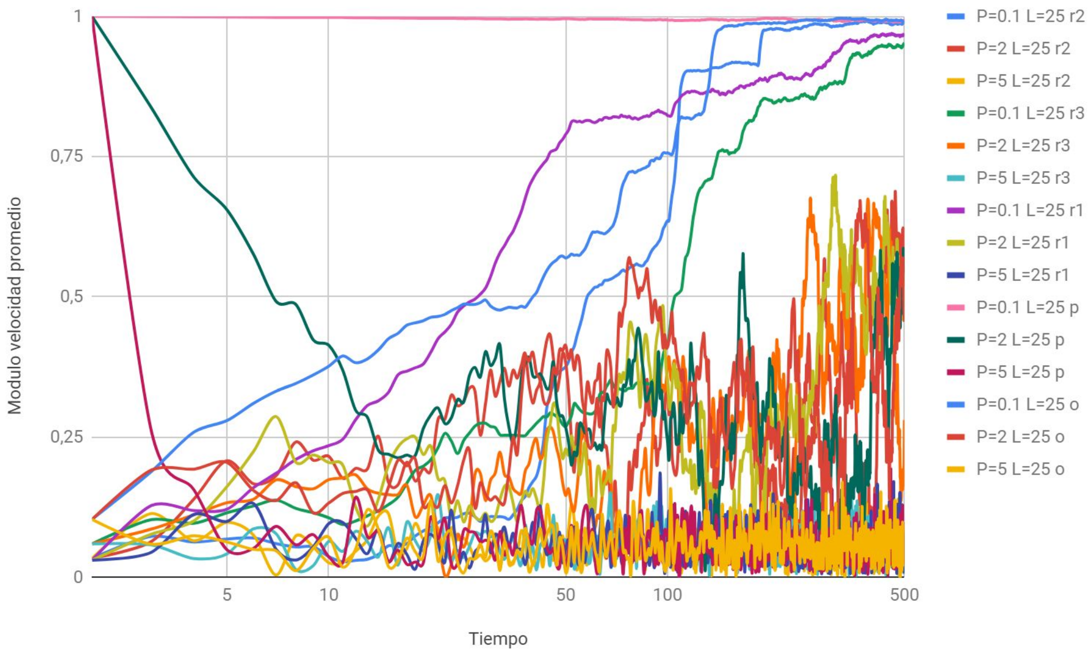

Figura 2.a: Idem Fig.1 pero con celdas de tamaño *L*=25.

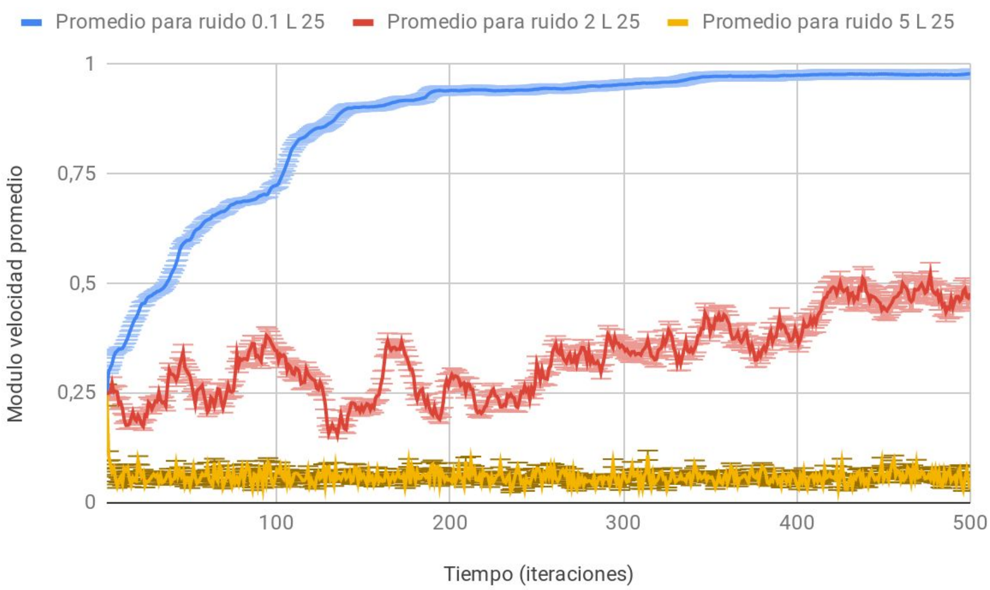

Figura 2.b: Promedio de los diferentes valores de entrada. Error promedio del 2%, 7% y 5% para ruidos 0.1, 2 y 5 respectivamente.

Se procede a analizar la relación entre v_a y η, disminuyendo gradualmente la cantidad de perturbación η ([0.1 - 5] con intervalos de 0.5) para celdas de tamaño L=25 con N=100 y N=500. Se observa una transición de una fase en movimiento desordenada a una fase con un movimiento coherente de las partículas (Fig.3). El error de los valores de v_a está representado por barras verticales. Para estos valores η los errores estadísticos estimados a partir de dos valores de N diferentes están en el rango del 5%.

Al observar Fig.3, a simple vista se identifica que a medida que la perturbación aumenta, el valor de v_a tiende a 0; y su contraparte, si la perturbación es baja, el valor de v_a está cerca de 1. Se trata de una función que, a partir de cierto punto, se asemeja a una función logarítmica decreciente. Por otro lado, si bien sólo se analizan dos cantidades de partículas diferentes N, cumplen con lo que sucede en [1], donde a mayor número de partículas el descenso es más empinado, es decir, que se consiguen valores cercanos al 0 a menor perturbación. En resumen, a menor ruido, mayor orden en el comportamiento del sistema.

Por otro lado se analiza la relación entre v_a y δ, manteniendo un valor de perturbación fijo (η = 0.4) (Fig.4). El error de los valores de v_a está representado por barras verticales.

Al observar Fig.4, se detecta algo similar a lo que sucede en la Fig.3 pero de manera inversa, es decir creciente: a medida que aumenta la densidad, el valor de v_a tiende a 1; y su contraparte, si la densidad es baja, el valor de v_a está cerca de 0. En resumen, a mayor densidad, mayor orden en el comportamiento del sistema.

Si ambos razonamientos se toman en conjunto, a mayor densidad y menor ruido, mayor es el orden del comportamiento del sistema (Fig.7).

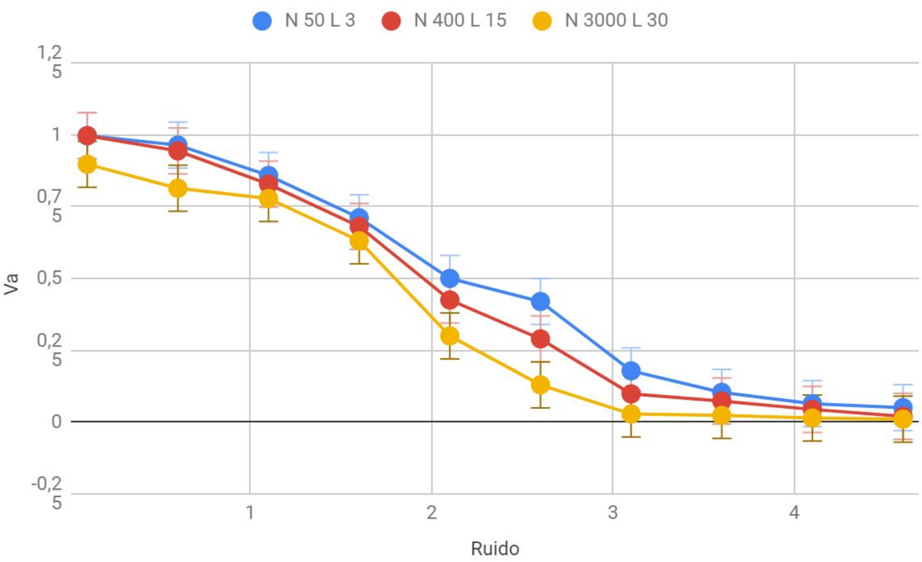

Figura 3: Se grafica el valor absoluto de la velocidad promedio *normalizada* (v_a) con su respectivo error en función del valor de la perturbación (η) y cantidades de partículas N=50, N=400 y N=3000.

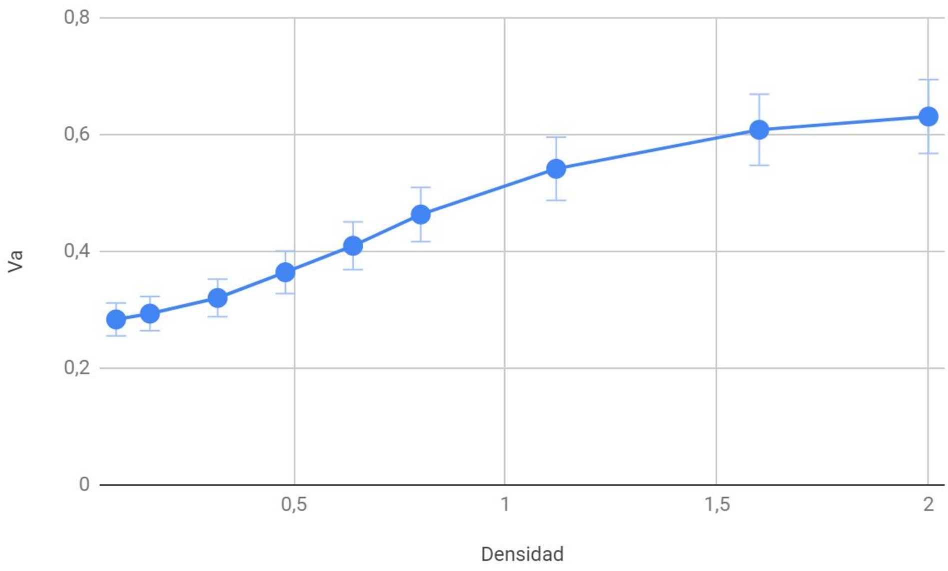

Figura 4: Se grafica el valor absoluto de la velocidad promedio *normalizada* (v_a) con su respectivo error en función de la densidad (δ), para un valor de perturbación fijo (η = 2) .

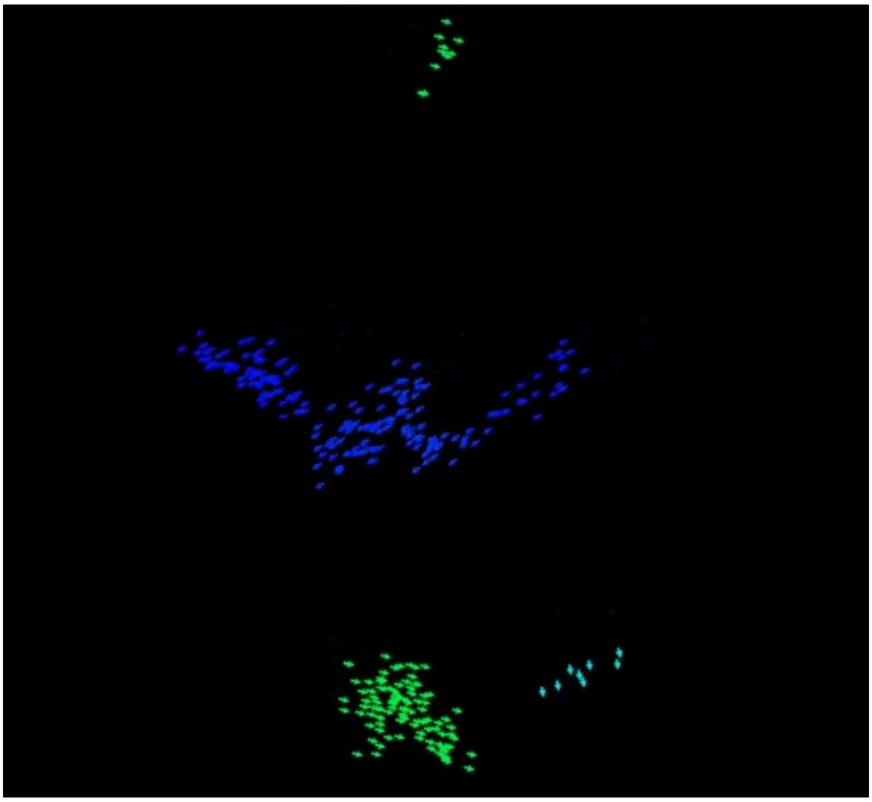

Figura 5: Animación luego de aproximadamente 200 iteraciones, de un sistema de densidad baja y perturbación baja (N=300, L=25, η = 0.1) .

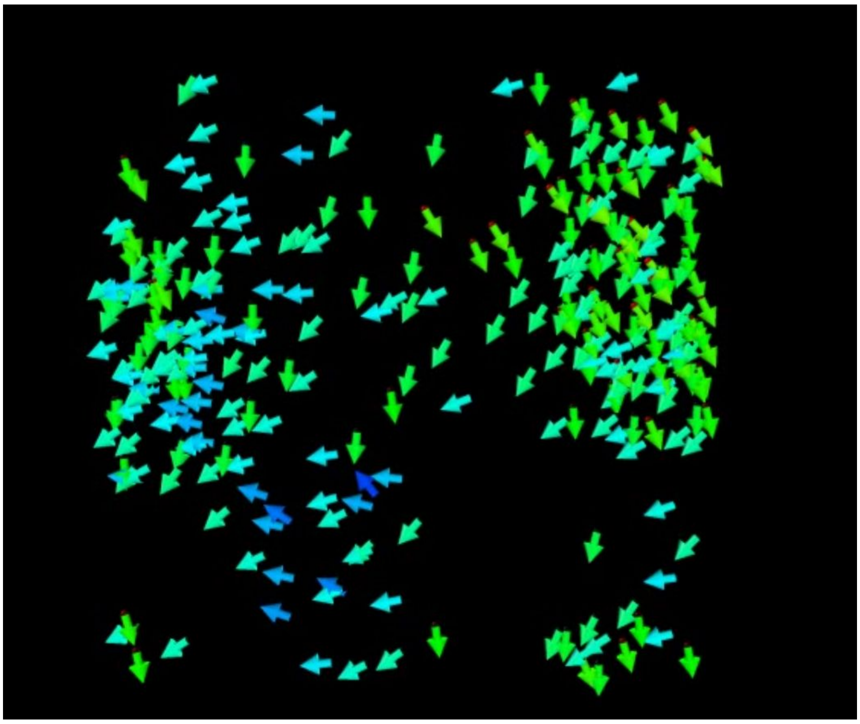

Figura 6: Animación luego de aproximadamente 400 iteraciones, de un sistema de densidad alta y perturbación alta (N=300, L=7, η = 2) .

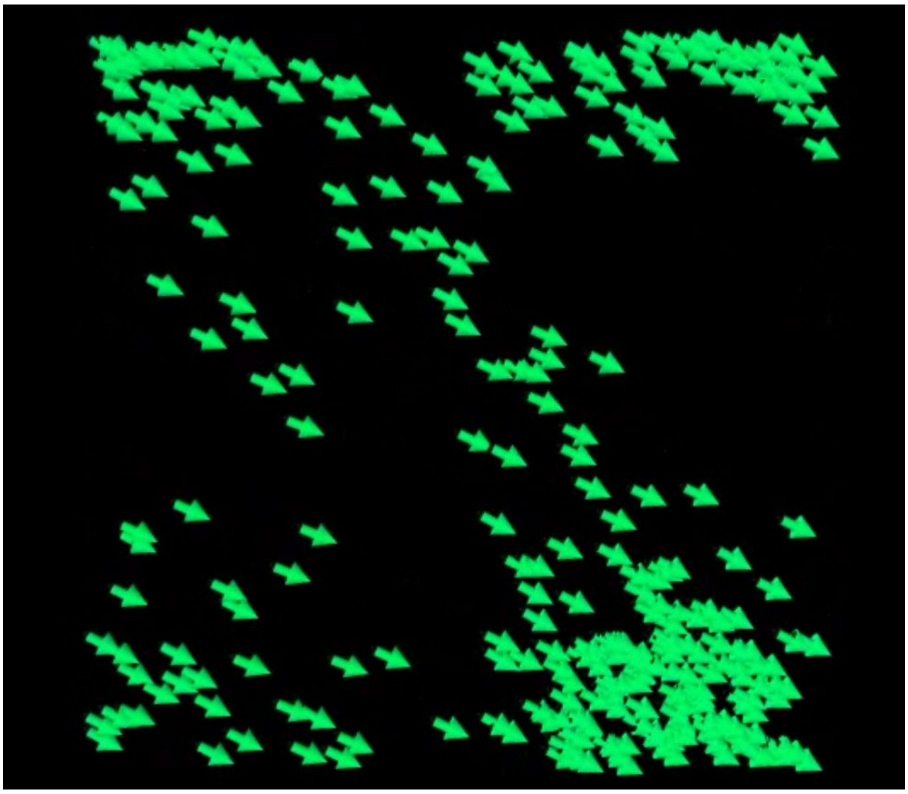

Figura 7: Animación luego de aproximadamente 100 iteraciones, de un sistema de densidad alta y perturbación baja (N=300, L=7, η = 0.1) .

5. Conclusiones

Luego de analizar en profundidad el comportamiento de distintos sistemas, se destacan patrones con los cuales se establecieron algunas generalizaciones:

- El valor de L está relacionado con el valor del radio de interacción. Este último debe ser menor, para una mejor visualización del avance del sistema hacia el estado estacionario, pero midiendo siempre que no sea lo suficientemente pequeño de manera tal que no exista interacción (entra en juego el valor de N). Cuanto menor es la relación r_c/L, más pronunciada es la caída de la curva de polarización.
- A mayor nivel de perturbación, se pierde convergencia y el sistema resulta más desordenado.
- A medida que baja la densidad, la oscilación se produce a valores de perturbación más bajos.
- A mayor densidad, aumenta la convergencia y el sistema resulta más ordenado.

6. Referencias

[1] Vicsek, T., Czirók, A., Ben-Jacob, E., Cohen, I., & Shochet, O. (1995). Novel type of phase transition in a system of self-driven particles. Physical review letters, 75(6), 1226.